

УДК 004.384.4:681.7.069.2

## АНАЛИЗ СПЕКТРОВ ОПТИЧЕСКОГО ОТРАЖЕНИЯ И КОНТРОЛЬ ПАРАМЕТРОВ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУР

В.А.Васильев

Пензенский государственный университет  
Пенза, 440017, Красная, 40  
paspen@rambler.ru

Поступила в редакцию 3 июня 2002 г.

В работе показаны возможности анализа экспериментальных спектров оптического отражения и контроля параметров полупроводниковых структур путём моделирования спектров на основе матричного формализма и модели диэлектрической проницаемости, учитывающей многомодовое поведение фононного спектра. Изложена методика моделирования спектров отражения полупроводниковых структур. Представлены результаты теоретических и экспериментальных исследований. Дана оценка достоверности и точности определения параметров по результатам моделирования на основе экспериментальных данных.

В субмиллиметровом или длинноволновом ИК диапазоне длин волн от 15 до 1000 мкм (волновых чисел от 10 до 650 см<sup>-1</sup>) в спектрах отражения полупроводников и полупроводниковых структур проявляются полосы решёточных и плазменных колебаний, интерференция слоев. Путём моделирования спектров отражения на основе экспериментальных данных представляется возможным анализ спектров и контроль различных параметров и характеристик полупроводников: плазменной частоты  $\omega_p$ , частоты поперечных оптических фононов  $\omega_T$ , концентрации свободных носителей заряда  $n$  и подвижности свободных носителей заряда  $m$ . Кроме того, по спектрам длинноволнового оптического отражения можно определять толщины тонких полупроводниковых и диэлектрических слоёв [1-4].

**Модель коэффициента преломления (диэлектрической проницаемости).** При исследовании длинноволновых возбуждений кристалл

**Васильев Валерий Анатольевич - кандидат физико-математических наук, доцент кафедры "Микроэлектроника" Пензенского государственного университета.**

**Область научных интересов - физика полупроводников и диэлектриков, оптическая спектроскопия, измерительные приборы и преобразователи.**

**Автор 103 опубликованных работ, в том числе 33 изобретений.**

можно рассматривать как непрерывную среду. Макроскопическая теория длинноволновых оптических колебаний решетки в ионных кристаллах была впервые развита Хуаном Кунем [5,6]. Она основана на том, что длинноволновые колеба-

ния в ионных кристаллах, содержащих по два иона в элементарной ячейке, связаны с относительным смещением подрешеток положительных и отрицательных ионов. Рассмотрение уравнения движения для случая продольных и поперечных колебаний ионов позволяет получить простое соотношение между частотами продольных  $\omega_L$  и поперечных  $\omega_T$  колебаний:

$$\omega_L^2 = \frac{\epsilon_s}{\epsilon_\infty} \cdot \omega_T^2, \quad (1)$$

где  $\epsilon_s$  - статическая диэлектрическая проницаемость;  $\epsilon_\infty$  - диэлектрическая проницаемость на бесконечной частоте.

Согласно модели диэлектрической проницаемости (учитывающей ангармонические эффек-

ты), предложенной Хуаном Кунем, коэффициент преломления может быть определен по формуле

$$n(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)} = \left( \varepsilon_x + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_x) \cdot \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 - i \cdot \gamma \cdot \omega} \right), \quad (2)$$

где  $\gamma$  - параметр затухания.

В области частот  $\omega_T < \omega < \omega_L$  действительная часть диэлектрической проницаемости  $\varepsilon(\omega)$  отрицательна, а комплексный показатель преломления  $n(\omega)$  является чисто мнимой величиной.

С помощью формулы (2) можно получить достаточно хорошее описание изменения коэффициента преломления в области частот оптических фононов.

Если энергия фотона мала по сравнению с шириной запрещенной зоны, то существенным оказывается взаимодействие электромагнитного излучения со свободными носителями заряда.

Оптическая электропроводность согласно формуле Друде [6] равна:

$$\sigma = \frac{N \cdot e^2}{m^* \cdot \omega^2 \cdot \tau}, \quad (3)$$

где  $N$  - концентрация свободных носителей заряда;  $m^*$  - эффективная масса носителей заряда;  $\tau$  - время релаксации;  $e$  - заряд электрона.

Коэффициент преломления в этом случае определяется по формуле

$$n(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)} = \left( \varepsilon_x - \frac{\varepsilon_x \cdot \omega_p^2}{\omega \cdot \left( \omega + \frac{i}{\tau} \right)} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (4)$$

где  $\omega_p$  - плазменная частота;  $\tau = \frac{\mu m^*}{e}$  - время релаксации;  $\mu$  - подвижность носителей заряда.

Электромагнитные волны могут распространяться в среде, только если действительная часть диэлектрической проницаемости положительна; в случае же, когда ее величина отрицательна, электромагнитная волна полностью отражается. Плазменная частота  $\omega_p$  отделяет область пропускания от области полного отражения и может быть определена в соответствии с (3):

$$\omega_p^2 = \frac{N \cdot e^2}{m^* \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_x}, \quad (5)$$

где  $N$  - концентрация электронов или дырок;  $e$  - заряд электрона.

Выражение (5) можно использовать для большинства полупроводников, так как в полупроводниках  $n$ -типа проводимости время релаксации  $\tau$  можно считать не зависящим от энергии носителя, поскольку электроны в зоне проводимости обладают большой подвижностью и малой эффективной массой.

В случае, когда энергии основного и неосновного минимумов зоны проводимости столь близки (к примеру, в GaAs), а температура такова, что оба они оказываются заселенными, коэффициент преломления можно рассчитать по формуле:

$$n(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)} = \left( \varepsilon_x - \frac{\varepsilon_x \cdot \omega_{pa}^2}{\omega \cdot \left( \omega + \frac{i}{\tau} \right)} + \frac{\varepsilon_x \cdot \omega_{pb}^2}{\omega \cdot \left( \omega + \frac{i}{\tau} \right)} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (6)$$

где

$$\omega_{pa}^2 = \frac{N_a \cdot e^2}{m_a^* \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_x}, \quad \omega_{pb}^2 = \frac{N_b \cdot e^2}{m_b^* \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_x}. \quad (7)$$

Здесь значки  $a$  и  $b$  относятся к основному и неосновному минимумам зоны проводимости.

В полупроводниках  $p$ -типа дырочный вклад в диэлектрическую проницаемость может быть представлен в виде

$$\Delta \varepsilon(\omega) = \varepsilon_l(\omega) + \varepsilon_h(\omega) + \varepsilon_{lh}(\omega), \quad (8)$$

где  $\varepsilon_l(\omega)$  и  $\varepsilon_h(\omega)$  описывают вклады подзон легких и тяжелых дырок с эффективными массами  $m_l^*$ ,  $m_h^*$  и концентрациями  $N_l$  и  $N_h$  соответственно. Сумма этих вкладов имеет вид, аналогичный (8). Третий член связан с переходами между дырочными подзонами.

С учетом вкладов решеточных и плазменных колебаний коэффициент преломления может быть определен по формуле

$$n(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)} = \left( \varepsilon_x - \frac{\varepsilon_x \cdot \omega_p^2}{\omega \cdot \left( \omega + \frac{i}{\tau} \right)} + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_x) \cdot \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 - i \cdot \omega \cdot \gamma} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (9)$$

Если решеточных осцилляторов несколько, то выражение (9) приобретает вид [3]

$$n(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)} = \left\{ \varepsilon_x - \frac{\varepsilon_x \cdot \omega_p^2}{\omega \cdot \left( \omega + \frac{i}{\tau} \right)} + \sum_j \frac{S_j \omega_{Tj}^2}{\omega_{Tj}^2 - \omega^2 - i \cdot \omega \cdot \gamma_j} \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad (10)$$

где  $\varepsilon_x$  - высокочастотная диэлектрическая проницаемость;  $\omega_p$  - плазменная частота;  $\omega_{Tj}$  - частота  $j$ -го поперечного оптического фонона;  $\omega$  - текущая частота;  $S_j$  - сила  $j$ -го осциллятора;  $\tau$  - время релаксации;  $\gamma_j$  - параметр затухания. В случае твердого раствора высокочастотная диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon_x$  может быть определена линейной интерполяцией соответствующих значений компонент. Силы осцилляторов можно рассчитать по формуле

$$S_j = (\varepsilon_{sj} - \varepsilon_{xj}) \cdot X_j, \quad (11)$$

где  $\varepsilon_{xj}$ ,  $\varepsilon_{sj}$  - высокочастотная и низкочастотная

диэлектрические проницаемости;  $x_j$  - мольная доля компонента.

Моделирование спектров оптического отражения полупроводников и полупроводниковых структур может быть основано на обобщённой модели коэффициента преломления (диэлектрической проницаемости) (10).

**Матричный формализм в расчётах спектров оптического отражения полупроводниковых структур.** Для описания спектров оптического отражения полупроводниковых структур, представляющих собой эпитаксиальный слой на подложке, могут использоваться аналитические выражения. Так, коэффициент отражения со стороны подложки для однослойной структуры (слой на подложке) равен [1]:

$$R = \left| \frac{(1-n) + (1+n)[(n-n_s)/(n+n_s)] \cdot \exp(i4\pi\sigma h)}{(1+n) + (1-n)[(n-n_s)/(n+n_s)] \cdot \exp(i4\pi\sigma h)} \right|^2, \quad (12)$$

где  $n$ ,  $n_s$  - коэффициенты преломления слоя и подложки;  $h$  - толщина слоя;  $\sigma$  - волновое число;  $i = \sqrt{-1}$ .

Однако для расчета спектров оптического отражения и пропускания полупроводников и полупроводниковых структур наиболее удобным является матричный метод. Матричный метод в применении к диэлектрическим слоям описан в работе [7]. С его помощью представляется возможным учитывать неоднородность твёрдотельных структур, разбивая их на отдельные однородные слои и описывая каждый слой характеристической матрицей.

Рассмотрим существо задачи. Плоская электромагнитная волна падает слева на поверхность при  $z = 0$  под углом  $\varphi_a$ . Слоистая среда расположена между плоскостями  $z = 0$  и  $z = h$ , где  $h$  - толщина пленки. Свойства среды описываются следующими соотношениями:

$$n = \begin{cases} n_a \\ n(z) \\ n_s \end{cases}, \quad \varepsilon = \begin{cases} \varepsilon_0 \\ \varepsilon(z) \\ \varepsilon_s \end{cases}, \quad \mu = \begin{cases} \mu_0 \\ \mu(z) \\ \mu_s \end{cases}. \quad (13)$$

В случае полупроводников и диэлектриков  $\mu = 1$ .

Определение отражения или пропускания многослойной структуры с точки зрения электромагнитной теории сводится к решению краевой задачи.

В случае гармонических волн с временным фактором вида  $\exp(i\omega \cdot t)$  в среде, не содержащей зарядов, уравнения Максвелла преобразуются к виду

$$\begin{aligned} \text{rot} \vec{H} &= i\omega \varepsilon_0 \vec{E}, \\ \text{rot} \vec{E} &= i\omega \varepsilon_0 \vec{H}. \end{aligned} \quad (14)$$

В случае ТЕ - волн, решение уравнений (14) имеет вид

$$\begin{aligned} E_x &= U(z) \cdot \exp[i(\omega \cdot t - k \cdot S \cdot y)], \\ H_y &= V(z) \cdot \exp[i(\omega \cdot t - k \cdot S \cdot y)], \\ H_z &= W(z) \cdot \exp[i(\omega \cdot t - k \cdot S \cdot y)]. \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь  $S$  - постоянная, определяемая выражением  $S = n \cdot \sin \varphi$ ;  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ , где  $\lambda$  - длина волны в вакууме.

Функции  $U, V, W$  удовлетворяют уравнениям

$$\frac{dU}{dz} = -ik_\mu Z_0 V, \quad (16)$$

$$\frac{dV}{dz} = -ik(\varepsilon - \frac{S^2}{\mu}) \cdot \frac{U}{Z_0}, \quad (17)$$

$$W = -\frac{S \cdot V}{\mu \cdot Z_0}, \quad (18)$$

где  $Z_0 = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}}$  - волновое сопротивление вакуума.

Поскольку уравнения для  $U$  и  $V$  являются линейными дифференциальными уравнениями второго порядка, общее решение можно представить как линейную комбинацию двух частных решений. Если найдены пары частных решений для  $U$  и  $V$ :

$$\begin{aligned} U_1 &= p(z), \quad U_2 = P(z), \\ V_1 &= q(z), \quad V_2 = Q(z), \end{aligned} \quad (19)$$

общие решения можно записать в виде

$$\begin{aligned} U(z) &= A_1 P(z) + A_2 p(z), \\ V(z) &= B_1 Q(z) + B_2 q(z), \end{aligned} \quad (20)$$

где  $A_1, A_2, B_1, B_2$  - постоянные, которые определяются из условий

$$p(0) = Q_0 = 0, \quad P(0) = q(0) = 1 \quad (21)$$

с помощью уравнений (16), (17), (18) и (20).

Полагая, что  $U(0)=U$  и  $V(0)=V$ , определяются

$$\begin{aligned} U(z) &= P(z)U_0 + p(z)V_0, \\ V(z) &= Q(z)U_0 + q(z)V_0. \end{aligned} \quad (22)$$

Эти выражения можно представить в матричной форме:

$$\begin{bmatrix} U_0 \\ V_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q(z) & -p(z) \\ -Q(z) & P(z) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} U(z) \\ V(z) \end{bmatrix}. \quad (23)$$

Матрица  $M$  определяется как

$$M = [m_{ik}] = \begin{bmatrix} q(z) & -p(z) \\ -Q(z) & P(z) \end{bmatrix} \quad (24)$$

и называется характеристической матрицей.

Если многослойная структура состоит из  $N$  слоев (см. рис. 1), то матрица  $M$  для области, заключенной между  $z = 0$  и  $z = h$ , равна произведе-

нию матриц  $M_j$  для этих слоев:

$$M = \prod_{j=1}^N M_j. \quad (25)$$

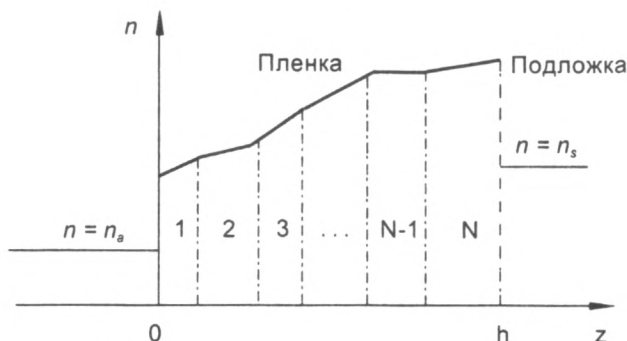


Рис. 1. Схема профиля показателя преломления

Коэффициенты отражения и пропускания по напряженности поля выражаются через матричные элементы матрицы  $m_{ik}$ :

$$\rho = \frac{(m_{11} + m_{12} \cdot n_s) n_a - (m_{21} + m_{22} n_s)}{(m_{11} + m_{12} n_s) n_a + (m_{21} + m_{22} n_s)}, \quad (26)$$

$$\tau = \frac{2 n_a}{(m_{11} + m_{12} n_s) n_a + (m_{21} + m_{22} n_s)}. \quad (27)$$

Коэффициенты отражения и пропускания по интенсивности соответственно равны:

$$R = |\rho|^2, \quad T = |\tau|^2 \frac{n_s \cos \varphi_s}{n_a \cos \varphi_a}. \quad (28)$$

На практике часто используются слои, имеющие градиент коэффициента преломления, который может быть обусловлен особенностями эпитаксиального роста, процессов диффузии или созданы намеренно для обеспечения требуемых характеристик структуры. Для описания таких структур может быть использовано гиперболическое распределение коэффициента преломления:

$$n(z) = \frac{n_1 n_2}{\left[ n_2 - (n_2 - n_1) \frac{z}{h} \right]}. \quad (29)$$

где  $n(z)$  - коэффициент преломления;  $n_1$  и  $n_2$  - значения коэффициента преломления на границах слоя;  $h$  - его толщина. Данное распределение удобно тем, что при малых  $\frac{n_2 - n_1}{n_1}$  оно практически линейно и позволяет при использовании матричного формализма записать характеристическую матрицу слоя в аналитическом виде:

$$M = \begin{bmatrix} \left( \frac{n_2}{n_1} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \cos \alpha + \frac{1}{2m} \sin \alpha \right) & i \beta \frac{(n_1 \cdot n_2)^{\frac{1}{2}}}{m (n_2 - n_1)} \sin \alpha \\ i \beta \frac{(n_1 \cdot n_2)^{\frac{3}{2}}}{m (n_2 - n_1)} \sin \alpha & \left( \frac{n_1}{n_2} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \cos \alpha - \frac{1}{2m} \sin \alpha \right) \end{bmatrix}, \quad (30)$$

где  $\alpha = m \cdot \ln \left( \frac{n_1}{n_2} \right)$ ,  $m^2 = \left[ \frac{\beta \cdot n_1 \cdot n_2}{(n_2 - n_1)} \right] - \frac{1}{4}$ ,  $\beta = 2 \pi \sigma h$ ,  $\sigma$  - волновое число;  $h$  - толщина слоя;  $i = \sqrt{-1}$ .

В частном случае однородного слоя ( $n_1 = n_2 = n$ ) характеристическая матрица имеет вид

$$M = \begin{bmatrix} \cos \beta n & (-i/n) \sin \beta n \\ -i n \sin \beta n & \cos \beta n \end{bmatrix}. \quad (31)$$

### Контроль параметров полупроводниковых структур.

В большинстве случаев спектры несут в себе достаточно большое количество информации. Знание законов изменения и методов анализа спектров позволяет не только обнаружить, зарегистрировать, но и произвести оценку качественных и количественных характеристик исследуемого объекта.

На рис.2 сплошной линией представлены спектры отражения бинарных полупроводников InSb, InAs и InP, снятые в длинноволновом ИК диапазоне. В спектрах явно проявляются полосы остаточных лучей в области  $185 \text{ см}^{-1}$ ,  $220 \text{ см}^{-1}$  и  $310 \text{ см}^{-1}$ , а также плазменное отражение в области до  $100 \text{ см}^{-1}$ . Известно, что плазменное отражение связано с взаимодействием электромагнитного излучения со свободными носителями заряда, а полосы остаточных лучей обусловлены решёточными колебаниями.

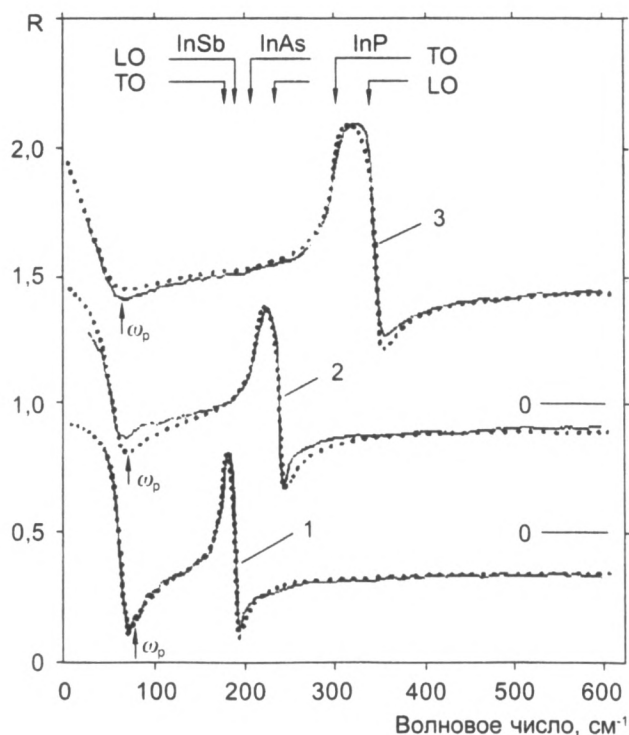


Рис.2. Спектры отражения n-InSb ( $n \sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ), n-InAs ( $n \sim 2,6 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ) и n-InP ( $n \sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ) при температуре 300K: линия - эксперимент, точки - расчет. Спектры 2 и 3 сдвинуты по вертикали, начало отсчета отмечено справа



Спектры оптического отражения, представленные на рис.2, хорошо описываются с использованием одноосцилляторной модели диэлектрической проницаемости, согласно которой коэффициент преломления выражается формулой (9). Коэффициент отражения рассчитывался по формуле, соответствующей нормальному падению света:

$$R = \left| \frac{1 - n}{1 + n} \right|^2 = \frac{(1 - n')^2 + (n'')^2}{(1 + n')^2 + (n'')^2}. \quad (32)$$

Теоретические спектры, показанные на рис.2

точками, подгонялись под экспериментальные данные до достижения наилучшего согласия. Величины  $\omega_p$ ,  $\omega_T$ ,  $\tau$ ,  $s = \epsilon_s - \epsilon_\infty$  и  $\gamma$  использовались как подгоночные параметры. Значения параметров образцов, определенные в результате процедуры подгонки теоретических спектров под экспериментальные данные, хорошо согласуются с литературными данными других измерений. Значения параметров образцов 1,2 и 3 (см. рис.2), определённые в результате процедуры компьютерной подгонки теоретических спектров под экспериментальные данные, сведены в табл. 1.

Таблица 1  
Значения параметров образцов полупроводниковых материалов

Образец	$\epsilon_\infty$	$\epsilon_s$	$\omega_T$ , $\text{см}^{-1}$	$s$	$\gamma$ , $\text{см}^{-1}$	$\omega_p$ , $\text{см}^{-1}$	$\tau$ , см
1 – n-InSb	15,7	17,9	180	2,2	4,0	78	0,08
2 – n-InAs	11,8	14,6	219	2,8	8,0	73	0,04
3 – n-InP	9,6	12,6	306	3,0	5,5	65	0,02

На рис.3 показаны спектры отражения образцов n-InAs, имеющих различную концентрацию свободных носителей заряда. Концентрация свободных носителей заряда в образце 2 больше, чем в образце 1. Рисунок наглядно иллюстрирует влияние свободных носителей заряда на спектр отражения. Край плазменного отражения с увеличением концентрации свободных носителей заряда смещается в сторону коротких волн (больших волновых чисел).

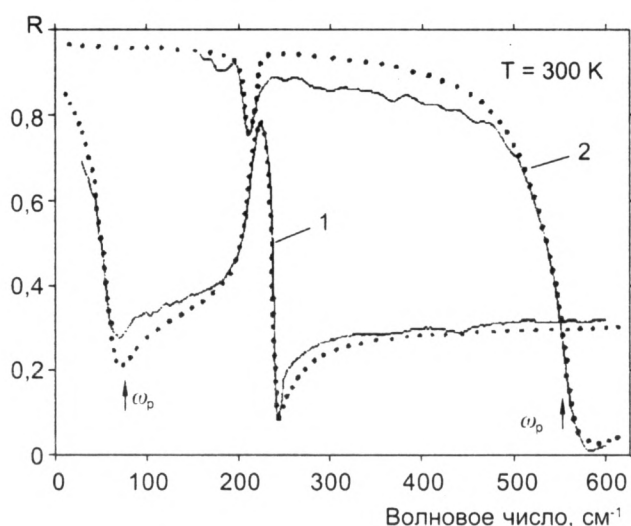


Рис.3. Спектры отражения n-InAs при различной концентрации свободных носителей заряда: линия – эксперимент, точки – расчет.  
1 – образец с  $n \sim 2,6 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$  ( $\omega_p = 73 \text{ см}^{-1}$ ); 2 – образец с  $n \sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$  ( $\omega_p = 550 \text{ см}^{-1}$ )

На рис.4 представлены спектры отражения образцов эпитаксиальной структуры

n-InAs<sub>0.63</sub>Sb<sub>0.12</sub>P<sub>0.25</sub>:Sn/p-InAs с различной концентрацией примеси Sn в эпитаксиальном слое.

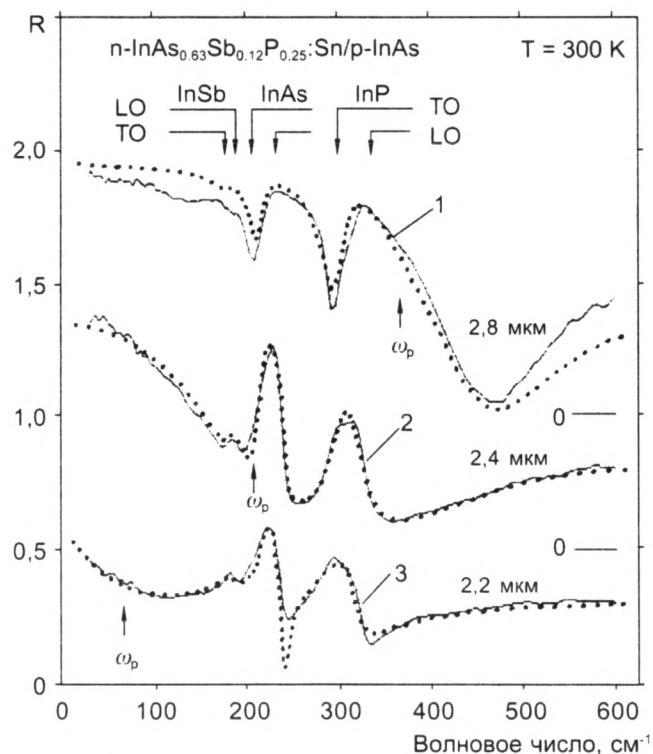


Рис.4. Спектры отражения эпитаксиальных структур n-InAs<sub>0.63</sub>Sb<sub>0.12</sub>P<sub>0.25</sub>:Sn/p-InAs: линия – эксперимент, точки – расчет

Концентрация свободных носителей заряда в образце 1 больше, чем в образце 2, а в образце 2 больше, чем в образце 3. Рисунок наглядно иллюстрирует влияние свободных носителей заряда

на спектр отражения. Край плазменного отражения, характеризуемый плазменной частотой  $\omega_p$ , с увеличением концентрации свободных носителей заряда  $n$  смещается в сторону коротких волн (больших волновых чисел). Для моделирования спектров отражения применялась однослойная модель расчета. Коэффициент преломления рассчитывался по формуле (10) при числе осцилляторов  $j=3$ . Коэффициент отражения рассчитывался по формулам (26) и (28), характеристическая матрица слоя и подложки рассчитывалась по формуле (31). Значения параметров слоя, определенные в результате процедуры подгонки теоретических спектров под экспериментальные данные, приведены в табл. 2.

Таблица 2

Параметры слоя полупроводниковой структуры  $n\text{-InAs}_{0.63}\text{Sb}_{0.12}\text{P}_{0.25}/\text{Sn/p-InAs}$

Образец	$\omega_p$ , $\text{см}^{-1}$	$\tau$ , $\text{см}$	$\gamma_1$ , $\text{см}^{-1}$	$\gamma_2$ , $\text{см}^{-1}$	$\gamma_3$ , $\text{см}^{-1}$	$h$ , $\mu\text{м}$
1	370	0,03	15	15	15	2,8
2	210	0,03	9	15	20	2,4
3	70	0,03	12	20	20	2,2

На рис.5 показано расчётное изменение положения минимумов в спектре отражения  $n\text{-InAs}_{0.63}\text{Sb}_{0.12}\text{P}_{0.25}$  в зависимости от плазменной частоты  $\omega_p$ . При вычислениях учитывалось уменьшение времени релаксации  $\tau$  с увеличением  $\omega_p$ . Изменение полагалось линейным, а числовые значения базировались на данных полученных при описании экспериментальных кривых рис. 4. Из рисунка видно, что наиболее сильное плазмон-фононное взаимодействие происходит в области 200 – 300  $\text{см}^{-1}$ , когда во взаимодействии участвуют все три фонона.

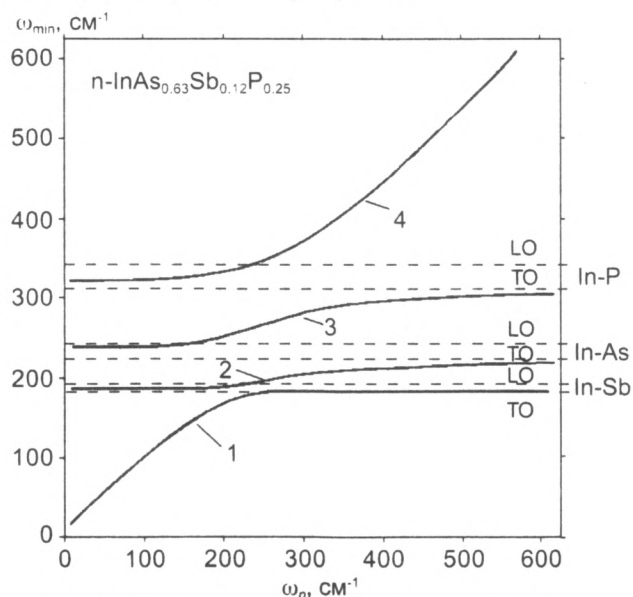


Рис.5. Положения минимумов в спектре отражения  $n\text{-InAs}_{0.63}\text{Sb}_{0.12}\text{P}_{0.25}$  в зависимости от плазменной частоты  $\omega_p$

Спектр оптического отражения эпитаксиальной структуры  $p\text{-InAs}_{0.63}\text{Sb}_{0.12}\text{P}_{0.25}/\text{Zn/n-InAs}$  показан на рис.6. Особенностью спектров отражения таких структур является то, что они не поддаются описанию с помощью однослойной модели из-за глубокого проникновения цинка Zn в подложку в процессе диффузии.

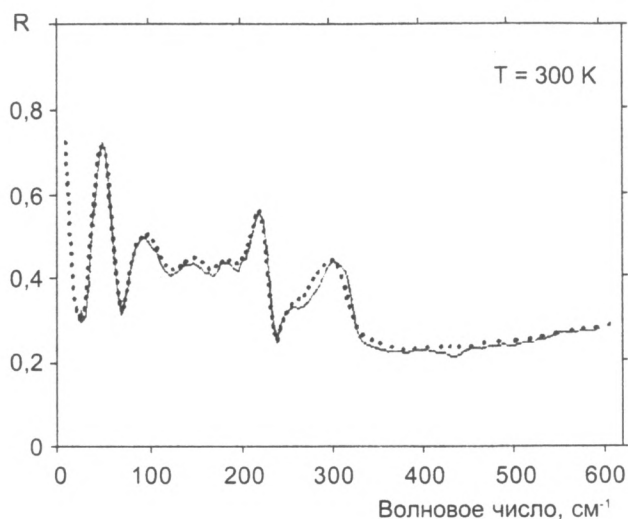


Рис.6. Спектр оптического отражения эпитаксиальной структуры  $p\text{-InAs}_{0.63}\text{Sb}_{0.12}\text{P}_{0.25}/\text{Zn/n-InAs}$ : линия – эксперимент, точки – расчёт (двухслойная модель с градиентными слоями)

Для описания спектра оптического отражения, изображённого на рис.6, применялась двухслойная модель расчета с градиентными слоями. Градиент коэффициента преломления задавался с помощью гиперболического распределения (27). Коэффициент преломления рассчитывался по формуле (10) при числе осцилляторов  $j=3$ . Характеристические матрицы слоёв определялись по формуле (28), подложки - по формуле (29), характеристическая матрица структуры - по формуле (23), коэффициент отражения - по формулам (24) и (26).

Значения параметров слоёв, определенные в результате процедуры подгонки теоретических спектров под экспериментальные данные, приведены в табл.3.

Первая цифра в индексе (табл.3) указывает номер слоя, вторая цифра в индексе – номер осциллятора (для  $g$ ). Заметим, что первый от поверхности слой представляет собой твердый раствор, а второй слой образован в подложке за счет диффузии примеси Zn. Установлено, что толщина первого слоя  $h_1=2.2$   $\mu\text{м}$ , а толщина второго слоя  $h_2=18$   $\mu\text{м}$ . Параметр  $h_2$  определяет период осцилляций в части спектра ниже 200  $\text{см}^{-1}$ . Осцилляции являются следствием интерферен-

ции в слое между областью объемного заряда и эпитаксиальным слоем. По параметру  $hS = h_1 +$

$h_2$  можно судить о положении р-п перехода в структуре.

Таблица 3

Параметры слоёв полупроводниковой структуры

$\omega_{p1}, \text{см}^{-1}$	$\omega_{p2}, \text{см}^{-1}$	$\tau_1 \cdot 10^3, \text{см}$	$\tau_2 \cdot 10^3, \text{см}$	$\gamma_{11}, \text{см}^{-1}$	$\gamma_{12}, \text{см}^{-1}$	$\gamma_{13}, \text{см}^{-1}$	$h_1, \text{мкм}$	$h_2, \text{мкм}$
220	55	2,0	0,11	16	25	27	2,2	18

**Достоверность и точность определения параметров.** Достоверность и точность параметров, получаемых из расчетной модели, оценивалась по чувствительности к параметрам слоя  $\omega_p$ ,  $\tau$ ,  $\chi$  и  $h$  на примере структуры  $\text{p-InAs}_{0.63}\text{Sb}_{0.12}\text{P}_{0.25}/\text{n-InAs}$ . К изменению плазменной частоты  $\omega_p$  расчетная модель имеет достаточно высокую чувствительность. Причем наблюдается практически линейная зависимость. Так, с изменением  $\omega_p$  на 10 % максимальное значение коэффициента отражения  $R$  тоже изменяется на величину  $\sim 10$  %. Следует заметить, что наибольшее изменение коэффициента отражения приходится на область частот решёточных колебаний и связано с плазмонфононным взаимодействием. Анализ отклонений других параметров показывает, что время релаксации  $\tau$  слабо влияет на коэффициент отражения  $R$ , и при изменении  $\tau$  на 50 % коэффициент отражения меняется не более чем на 8 %. Модель достаточно хорошо чувствительна к изменению параметров  $h$  и  $\chi$ . Изменение  $h$  на 50 % приводит к изменению коэффициента отражения до 15 %, а  $\chi$  на 10 % - к изменению коэффициента отражения до 25 %. Если в качестве нижнего предела чувствительности взять величину  $\sim 3$  %, то получим оценки относительных погрешностей определения параметров. Относительная погрешность определения параметров полупроводниковых слоёв приведена в табл. 4.

Таблица 4

Относительная погрешность определения параметров

Параметр	Относительная погрешность	Базовое значение
$\omega_p$	0,03	210 $\text{см}^{-1}$
$\tau$	0,5	0,03 $\text{см}$
$h$	0,15	2,4 $\text{мкм}$
$\chi$	0,05	0,25

**Оценка концентрации и подвижности свободных носителей заряда.** Подгоночные параметры, полученные из расчётных моделей и сведённые в табл. 1-3, в конечном итоге позволяют

определить такие важные характеристики полупроводника, как концентрацию свободных носителей заряда

$$n = \frac{\omega_p^2 m^* \epsilon_0 \epsilon_\infty}{e^2} \quad (33)$$

и подвижность

$$\mu = \frac{\tau \cdot e}{m^*} \quad (34)$$

где  $\epsilon_0$  - диэлектрическая постоянная,  $m^*$  - эффективная масса носителей заряда;  $\mu$  - подвижность носителей заряда;  $e$  - заряд электрона.

Значения  $n$  и  $\mu$ , получаемые из оптических измерений, достаточно хорошо коррелируют со значениями  $n$  и  $m$ , получаемыми по результатам измерений ЭДС Холла.

**Анализ глубины проникновения электромагнитного излучения.**

Формула

$$I(x) = I_0 \exp(-\alpha x) \quad (35)$$

известна в физике как закон Бугера-Ламберта, где  $\alpha = 2 \frac{\omega \cdot n''}{m}$  - коэффициент поглощения;  $I_0$  - интенсивность света, входящего через поверхность образца.

Из (35) следует, что величина, обратная показателю поглощения  $\alpha^{-1}$ , численно равна толщине слоя, на которой интенсивность проходящего света уменьшается в  $e$  раз. Таким образом, показатель поглощения имеет размерность, обратную длине, то есть  $\text{м}^{-1}$ .

Глубину проникновения электромагнитного излучения можно оценить по формуле

$$d = \frac{1}{2\pi\sigma n''(\omega)} \quad (36)$$

где  $n''(\omega)$  - мнимая часть коэффициента преломления;  $\sigma$  - волновое число.

На рис. 7 приведены зависимости глубины проникновения электромагнитного излучения от частоты для различных значений  $\omega_p$ , рассчитанные по формуле (34). Мнимая часть коэффициента преломления  $n''(\omega)$  определялась по формуле (9). Наименьшая глубина проникновения вблизи  $\omega_p$

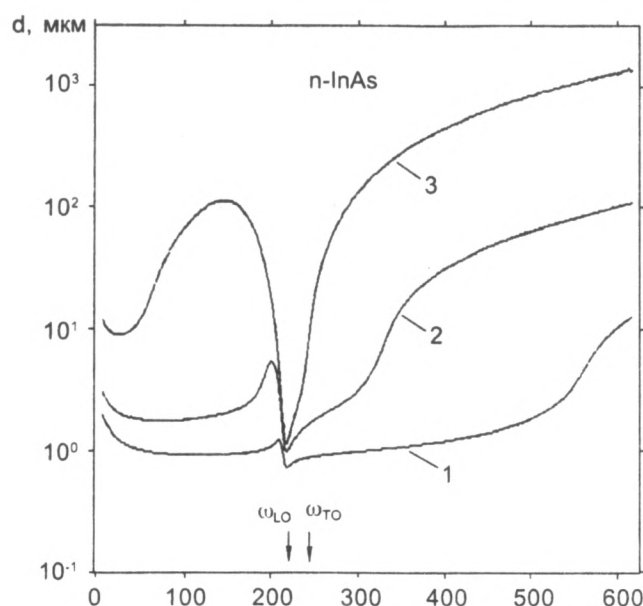


Рис.7. Глубина проникновения оптического излучения в n-InAs: 1- $\omega_p=550\text{ см}^{-1}$ ; 2- $\omega_p=300\text{ см}^{-1}$ ; 3- $\omega_p=75\text{ см}^{-1}$

С увеличением плазменной частоты глубина проникновения уменьшается. Так, при  $\omega_p=550\text{ см}^{-1}$  (что соответствует  $n\sim 10^{18}\text{ см}^{-3}$ ), кривая 1 (рис.7), глубина проникновения не превышает нескольких микрон. Глубина проникновения электромагнитного излучения в p-InAs несколько больше, чем в n-InAs, из-за большей эффективной массы дырок, а спектральная зависимость имеет аналогичный вид.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Зингер Г.М. Оптические свойства четверных твердых растворов на основе соединений  $A^3B^5$  в области решёточных и плазменных колебаний / Г.М.Зингер, И.П.Ипатова, А.И.Рыскин // ФТП. 1984.Т.18, №1. С.24-42.
2. Баранов А.Н. Физическая модель и определение характеристик гетероструктур  $\text{InAs}_x\text{Sb}_{1-x}\text{P}_{1-x-y}\text{InAs}_y$  оптическими методами / А.Н.Баранов, В.А.Васильев, А.А.Копылов, В.В.Шерстнев //Координационное совещание социалистических стран по физическим проблемам оптоэлектроники: Труды совещания, Баку. 1989. С.121.
3. Баранов А.Н. Оптическое отражение и определение характеристик эпитаксиальных структур  $\text{InAs}_{1-x}\text{Sb}_x\text{P}_y/\text{InAs}$  / А.Н.Баранов, В.А.Васильев, А.Н.Копылов, В.В.Шерстнев // ФТП. 1991. Т.25, №1. С.99-101.
4. Васильев В.А. Информационная модель взаимодействия оптического излучения с полупроводниковой структурой // Микросистемная техника. 2002. №3. С.8-12.
5. Борн М. Динамическая теория кристаллических решёток / М.Борн, Х. Кунь. М.: Мир, 1958. 488 с.
6. Давыдов А.С. Теория твёрдого тела. М.: «Наука», 1976. 639 с.
7. Физика тонких плёнок / Под ред.Г.Хасса, М.Франкомба и Р.Гофмана. М.:Мир,1967. Т.8. С.91-151.
8. Васильев В.А. Информационные возможности и эффективность моделирования спектров отражения и пропускания электромагнитного излучения полупроводниковых структур в субмиллиметровом диапазоне// XXIX Международная конференция «Информационные технологии в науке, образовании, телекоммуникации, бизнесе»: Труды конференции. Ялта, Гурзуф, 2002. С.59-63.

\* \* \* \* \*

#### ANALYSIS OF OPTICAL REFLECTING SPECTRUMS AND CHECKING THE PARAMETERS OF SEMICONDUCTOR STRUCTURES

V.A.Vasiljev

*In work it is shown the possibility of experimental spectrums analysis of optical reflecting and checking the parameters of semiconductor structures by the way a modeling of spectrums on the base of matrix formalism and models an dielectric permeability. The strategy of reflecting spectrums modeling the semiconductor structures it is stated. The results of theoretical and experimental studies are presented. The evaluation of validity and accuracy of parameters determination is given.*